

# Modellierung industrieller Prozesse zur Züchtung von Silicium-Einkristallen

Mühlbauer, Alfred

Veröffentlicht in:  
Jahrbuch 2001 der Braunschweigischen  
Wissenschaftlichen Gesellschaft, S.57-59



J. Cramer Verlag, Braunschweig

ALFRED MÜHLBAUER, Hannover

## **Modellierung industrieller Prozesse zur Züchtung von Silicium-Einkristallen**

Braunschweig, 12.10.2001\*

Einkristallines Silicium (Si) ist seit Jahrzehnten das meistverwendete Basismaterial für die Herstellung von Halbleiterbauelementen. Diskrete Bauelemente und integrierte Schaltungen werden dabei auf Wafern produziert, die aus stabförmig gezüchteten hochreinen und hochperfekten Einkristallen hergestellt werden. Etwa 95% der Einkristalle werden gegenwärtig nach dem *Czochralski* (CZ)- Verfahren aus dem Tiegel gezogen, während der verbleibende Anteil nach dem *Floating-Zone* (FZ)- Verfahren tiegelfrei hergestellt wird. CZ-Si wird vorwiegend für die Produktion mikroelektronischer Schaltkreise verwendet, FZ-Si hingegen für leistungselektronische Bauelemente.

Der in der Industrie ungebrochene Trend zur Vergrößerung der Waferfläche und damit der Einkristalldurchmesser von heute 300 mm für CZ- und 200 mm für FZ- Material ist mit einer ganzen Reihe von großen Herausforderungen entlang der Prozesskette (Einkristallzüchtung, Waferherstellung, bis hin zur Fertigung der Bauelemente) verbunden. Eine rein empirische, vorwiegend auf Experimente gestützte Weiterentwicklung der Einkristall-Ziehverfahren ist wegen der komplexen gegenseitigen Abhängigkeit der Parameter und den hohen Anforderungen an die strukturelle Perfektion der Kristalle sehr schwierig, zeitaufwändig und damit auch besonders teuer. Hier bietet die mathematisch-physikalische Modellierung ein hervorragend geeignetes Mittel über die numerische Nachbildung der Züchtungsprozesse die Verfahrensentwicklung signifikant zu unterstützen. Die Einwirkungen zusätzlicher und neuartiger Maßnahmen lassen sich vorherbestimmen, geeignete Modellketten entwickeln und damit Hinweise für eine optimierte Kristallzüchtung liefern.

Beim Tiegelziehverfahren nach *Czochralski* sind mit dem Übergang der Kristalldurchmesser von 200 mm auf 300 mm, was gleichbedeutend ist mit einer Erhöhung der Schmelzenmasse von etwa 120 kg auf 300 kg und mehr, große Anforderungen an die Zieh-Apparatur, die Kristallqualität und an die Wirtschaftlichkeit des Prozesses verbunden. Diese lassen sich mit der bisherigen Züchtungstechnologie nicht erfüllen. Neben einer angepassten thermischen und konstruktiven Auslegung der neuen Ziehanlagen werden vor allem von einer kontaktlosen externen Strömungsbeeinflussung durch elektromagnetische (EM) Felder zusätzliche Möglichkeiten zur Prozessgestaltung erwartet. Die Kenntnis des Einflusses einer solchen magnetfeldinduzierten Konvektion auf den Wärme- und Stofftransport in der Si- Schmelze ermöglicht den zweckmäßigen Entwurf und den erfolgreichen Einsatz entsprechender felderregender Induktoren. Untersucht werden einige Induktor-

---

\* Kurzfassung eines Vortrages gehalten in der Klasse für Ingenieurwissenschaften der Braunschweigischen Wissenschaftlichen Gesellschaft

anordnungen, die nicht rotierende axialsymmetrische Wechselfelder zu erzeugen gestatten. Diese sind prinzipiell auch für den Einbau in industrielle CZ- Anlagen geeignet.

Für die Analyse der Auswirkungen derartiger Felder wird ein System von Simulationsprogrammen eingesetzt, mit dem die elektromagnetischen, hydrodynamischen und thermischen Verhältnisse innerhalb der Si-Schmelze nachgebildet werden können. Die Berechnungen erfolgten in axialsymmetrisch-zweidimensionaler Näherung. Das Programmsystem wurde eingehend anhand von Vergleichen mit Versuchsergebnissen aus einer CZ-Modellanlage getestet, die mit einer niedrig schmelzenden Legierung (InGaSn) betrieben wird. Die Vergleichsergebnisse zeigen, dass die Simulationsprogramme insbesondere in den für industrielle Ziehprozesse relevanten Parameterbereichen zuverlässig arbeiten. Zudem konnte die Eignung der verwendeten LowRe- Turbulenzmodelle nachgewiesen werden.

Zur Beurteilung der Wirkung der EM- Felder wurden geeignete Vergleichswerte mit engem Bezug zu den Anforderungen an den Ziehprozess und die Kristallqualität herangezogen. Dazu gehören hohe Ziehgeschwindigkeiten, die ein Maß für die Wirtschaftlichkeit des Prozesses sind, die Lage des OSF (Oxidation Induced Stacking Fault)- Rings sowie der Sauerstoffgehalt im wachsenden Kristall. Wegen der komplexen Abhängigkeit und der Nichtlinearität der Vorgänge in der Schmelze wurde für jedes der betrachteten Felder eine Vielzahl von Werten für die Einflussparameter untersucht. Die betrachteten Parameter umfassen die Tiegeldrehzahl, die Kristalldrehzahl, die elektrische Durchflutung der Magnetfeld- Induktoren sowie die Frequenz des Induktorstroms.

Die prinzipiellen Zusammenhänge des Einflusses externer, kontaktlos wirkender EM- Felder auf die Schmelzenströmung werden dargestellt. Insbesondere das Zusammenwirken von azimuthaler und meridionaler Schmelzenströmung sowie der Wärmetransport in der Umgebung der Kristallkante und seine Bedeutung für die Erhöhung der Ziehgeschwindigkeit werden analysiert. Die daraus gewonnenen Erkenntnisse liefern zusammen mit den Simulationsergebnissen ein anschauliches Bild von den Vorgängen in der Schmelze bei der Verwendung von regelbaren EM- Feldern. So wird gezeigt, dass die Auswahl bestimmter Kombinationen der elektrischen Durchflutung in den Induktoren und der Tiegeldrehzahl ganz entscheidend ist für die Gewährleistung günstiger Wärmetransportverhältnisse in der Umgebung der Kristallkante im Hinblick auf hohe Ziehgeschwindigkeiten. Das EM-Wanderfeld nach unten erweist sich schließlich als der vielversprechendste Feldtyp, da sich mit ihm neben einer Steigerung der Ziehgeschwindigkeit auch der Sauerstoffgehalt im Kristall erhöhen und seine axiale Homogenität verbessern lassen.

Ein weiterer Schritt bei der Entwicklung der Simulationsprogramme für den CZ- Prozess ist die Einbeziehung transients Vorgänge. Insbesondere durch die Analyse von Fluktuationen der Temperatur und der Strömungsgeschwindigkeit unter der Kristallisationsfront können weitergehende Aussagen zur Stabilität des Ziehprozesses abgeleitet werden. Um einen Zusammenhang zwischen diesen Fluktuationen und der Versetzungsbildung herzustellen, bedarf es der Weiterentwicklung der physikalischen Vorstellungen und der mathematischen Modelle. Eine enge Verknüpfung der numerischen Simulation mit den Ergebnissen experimenteller Untersuchungen ist hierfür unabdingbar.

Der Einsatz dreidimensionaler Simulationsprogramme als ingenieurtechnisches Werkzeug wird derzeit allerdings durch den hohen Bedarf an Rechnerkapazität und Berechnungszeit erschwert. Jedoch wird gerade im Hinblick auf eine präzise Modellierung des Sauerstofftransports der in großformatigen Tiegeln ausgeprägt turbulent strömenden Schmelze die dreidimensionale transiente Simulation in Zukunft unerlässlich sein.

Auch für das *Floating-Zone*-Verfahren, bei dem der polykristalline Vorratsstab über einen Flachinduktor aufgeschmolzen und die entstehende Schmelzzone stabil gehalten wird, hat sich die Prozesssimulation als wichtiges Mittel für die Weiterentwicklung und Verbesserung dieses tiegelfreien Züchtungsverfahrens etabliert. Die entwickelte Modellkette beinhaltet die Berechnung aller Phasengrenzen der flüssigen Zone, inklusive der Berechnung des EM- und des Temperaturfeldes der gesamten Anordnung. Ebenso werden die laminare Strömung und das Temperaturfeld in der Schmelze wie auch das Konzentrationsfeld der Dotierstoffe an der Kristallisationsfront transient berechnet und die sich darauf ergebenden makroskopischen und mikroskopischen Profile des elektrischen Widerstands im Einkristall ermittelt. Die erhaltenen Ergebnisse wie Geometrie der Phasengrenzen, Temperaturfluktuationen in der Schmelze und Widerstandsschwankungen im Einkristall wurden mit experimentellen Daten verglichen und zeigen eine gute Übereinstimmung.

Auch für den FZ-Prozess wurde der Einfluss zusätzlicher EM-Felder detailliert untersucht. Hierbei galt es die Homogenität der Dotierstoffverteilung im Kristall sowohl makroskopisch als auch mikroskopisch entscheidend zu verbessern und so die Herstellung von Kristallen und Wafern mit möglichst homogener Widerstandsverteilung zu ermöglichen. Verschiedene Feldtypen mit unterschiedlicher Erregung und Frequenz wurden erfolgreich untersucht und jene Kombinationen ermittelt, die das gesteckte Ziel am besten zu erreichen gestatten. Eine unter Praxisbedingungen durchgeführte Erprobung bestätigte die Vorhersage in befriedigender Weise, sodass auch bei der Einkristallzüchtung nach dem FZ-Verfahren mittels zusätzlicher magnetfeldinduzierter Konvektion eine signifikante Prozessverbesserung erreicht werden konnte.